

サイ・テク  
こらむ  
**知と技の発信**

(113)

埼玉大学・理工学研究の現場

■理論化学

理論化学といふ言葉を存じてゐるうか？理論物理学といふと、相対論や素粒子論あるいは宇宙論など、ある程度の世間の認知度があるだろうが、理論化学にはほとんどなじみがないのが実情ではないだろうか。

理詮化学は簡単に言表は物質を記述するのに基本となる量子力学や統計力学を用いて、化学現象の本質を明らかにしようという比較的新しい学問分野である。

A black and white portrait of a man with dark hair and glasses, wearing a dark, ribbed sweater. He is looking directly at the camera with a neutral expression. The background is slightly blurred, showing what appears to be an indoor setting with some equipment or furniture.

高柳 敏幸氏（たかやなぎ  
・としゆき）63年生まれ。東京工業大学大学院総合理工学研究科博士課程修了。博士（理学）。日本原子力研究所（現・日本原子力研究開発機構）研究員を経て、04年埼玉大学。07年より現職。専門は量子論に基づいた化学反応動力学の理論的研究。

# 化学とコンピュータ

高柳 敏幸 大学院理工学研究科 教授

研究している理論化学者である。大抵の方は、化学者と言えば白衣やビーカー、フラスコなどを思い浮かべるだろうが、私は白衣も着なければ、実験もない。私の主な研究道具は計算機つまりコンピュータである。

### ■方程式で理解

化学反応は、狭い意味では結合の組み換えであり、この現象を支配しているのは原子の中の電子である。電子の運動は量子力学の方程式で記述できるので、これを解けば化学反応をすべて理解することができるはずである。

化学反応に関わる問題では膨大な数の方程式を解く必要があるので、コンピュータに頼ることになる。現在では、水素や水の分子1個だけであれば、コンピュータで完全に計算でき、実験するよりも正確な答えが得ら

■ 現代理論化に思えるから説明しそうなるきる。今するだけるために実際界中で行  
る。しかしながらそれが関わるためにタクタを使う計算するそのた  
者は、なにようして、夫間内で解っているのである。

し、たくさんある  
る化学反応  
は、スペー  
つてもまだま  
じとはできな  
ため、われわ  
なるべく正確  
な近似法や手  
方程式が現実  
解けるように  
ある。

れ理論化され、性を損ねず、モデルを開発的で計算的な工夫をし、い。

ウムは物をつ  
論化學  
念の分子  
がで  
He B  
の分子  
る。また  
宙に存  
である。  
宇  
空間で  
宙環境  
ができる  
にはそ  
である。  
近い  
がもつ  
かを混  
れぐら  
タで予  
はない

不活性原子それが、化合物の性質をもたらすものであることを教わるが、理屈を利用するとヘリウムを分子の存在を予言することができる。私の研究室では最近  $\text{eO} \rightleftharpoons \text{He Cu F}$  などのがじめるとが測つて、星間分子と呼ばれる分子が存在する分子がどのよひにかについても研究している。宇宙は希薄で極めて冷たいため、実験室では宇宙を簡単につくるだすといふのが、ノンピュータによる計算によつて、このような制約はないから。将来、理論化学と計算機と発展すれば、何かと何ぜて、どんな生成物ができるかをノンピューターで測できる時代が来るのではないか。

## 埼玉経済

企業、団体商店街などの話題や情報を寄せ下さい  
TEL 048・795・9161 FAX 048・653・9040